arXiv:2303.01970v2 [quant-ph] 7 Nov 2023

近期量子计算机上的自适应分区模拟量子模拟：金刚石中NV中心的非经典自由感应衰减

Yun-Hua Kuo[1] and Hong-Bin Chen[1,2,3,*]

[1] *Department of Engineering Science, National Cheng Kung University, Tainan 701401, Taiwan*
[2] *Center for Quantum Frontiers of Research & Technology, NCKU, Tainan 701401, Taiwan*[3] *Physics Division, National Center for Theoretical Sciences, Taipei 10617, Taiwan*（日期：2023年11月8日）

利用可控量子设备模拟量子物理的想法早在几十年前就已提出。随着量子技术的广泛发展，大规模模拟（例如通过模拟量子模拟设计人工哈密顿量，以模仿所关注的系统）已在复杂的量子实验平台上实现。然而，由于显著噪声和连接性带来的限制，模拟量子模拟通常无法在近期量子计算平台上实现。本文提出了一种在近期量子设备上进行模拟量子模拟的替代方法。我们的方法根据量子设备的性能，将浴自适应地划分为若干组，从而绕开这些限制。我们应用该方法模拟金刚石NV^-中心中与大量原子核耦合的电子自旋的自由感应衰减，并研究由核自旋极化引起的非经典性。该模拟在IBM量子计算机上通过真实设备与模拟器协作实现。我们还应用该方法处理由量子比特间串扰造成的非经典噪声。这项工作为在含噪近期量子计算机上模拟大规模材料提供了一种灵活的方法。

一、引言

模拟量子物理长期以来一直被公认为是一项颇具挑战的问题 [1]。主要困难之一在于，随着大型量子系统的组成部分不断增加，其希尔伯特空间会呈指数级增长。这需要大量计算机内存来存储量子态以及作用于其上的量子操作。尤其是，如果我们还要研究量子系统的时间演化，计算资源所承受的负担将更加沉重，并迅速超出传统计算机的计算能力。

与其开发复杂但不可避免地只能得到近似结果的经典算法，解决量子物理模拟问题的另一种方案是利用量子力学系统的力量 [1–5], ，其依据是一个直观的想法：自然本身最终遵循量子力学规律。一种颇具吸引力的方法是，将所关注的可控性较低系统的哈密顿量直接映射到量子模拟器的哈密顿量上；该模拟器由控制良好的量子系统构成，这种方法称为模拟量子模拟（AQS）[6–8]。随着量子技术的广泛发展，AQS 已借助多种量子力学系统实现，包括超导电路[8–10], 、超冷原子 [7, 11], 、里德堡原子 [12, 13],和囚禁离子 [14–16]。值得注意的是，这些成功的 AQS 演示均在精心构建的量子实验平台上实现，而这类平台通常不向公众开放。

另一方面，近年来涌现出许多可编程量子计算平台。这些平台的特点是公众可以通过在线用户界面访问，从而为公众提供了体验量子力学原理的途径。尤其是，理论学家能够设计在量子计算机上运行的原型实验，以检验并展示理论概念。因此，许多量子力学基本原理的演示已在这些最新进展的量子计算平台上实现 [17–25]。

除了上述对量子信息论基本原理的演示外，人们也认为量子计算机能够灵活地模拟开放量子系统动力学 [26–29]。然而，近期量子计算机仍处于含噪中等规模量子（NISQ）设备 [30]时代。除了一些量子计算机性能超越传统计算机的突出突破 [31–33], 之外，由于显著噪声和量子比特拓扑连接性对性能的限制，直接模拟大规模材料仍然难以实现。无论是模拟排列成一维链 [26], 的少数原子，还是混合量子—经典算法 [34–36], 或变分量子算法 [37–39], ，都可以高效实现。另一种可在近期量子计算机上实现的方法称为 Trotter化 [26, 40–42], 。该方法依据 Suzuki-Trotter 公式，通过离散化并将整个时间演化算符分解为一系列较小的算符来进行近似。Trotter化的主要缺点是分解过程中引入的误差，因此有必要额外分析分解误差的影响。一种量子硬件——

* hongbinchen@gs.ncku.edu.tw

高效的方法值得期待，它能够以 AQS 的方式模拟大规模材料，同时避免 Trotter 分解误差。

另一方面，如何明确展示超越经典性的特定真实量子性，长期以来一直是一个备受关注的研究课题 [43–46]。随着量子理论的发展，这些研究加深了我们对自然界量子性的认识。重要的研究范式包括非经典关联 [47–49]以及量子态的非经典性 [50–52]。此外，一种新兴的非经典性研究方向关注量子动力学过程的本质。人们提出了各种定义，以阐明量子动力学过程非经典性的不同方面 [53–61]。最近，我们还采用正则哈密顿量系综表示（CHER）技术探讨了这一问题 [62–64]，并将其应用于金刚石中带负电氮空位（NV⁻）中心的自由感应衰减（FID）过程 [65]。

在本研究中，我们提出了一种替代性的模拟方法，不仅能够在近期量子计算平台上模拟大规模材料，还能从微观层面揭示观测现象背后的物理机制。我们根据量子设备的性能，将浴自适应地划分为若干组，从而克服性能方面的限制。我们将该方法用于模拟金刚石晶格中 NV^- 中心电子自旋的 FID 过程，并在 IBM量子计算机（IBMQ） [66]上开展模拟。

为此，我们首先设计一个量子电路，用于实现与巨大核自旋浴耦合的 NV^- 中心的总哈密顿量。此外，为了实现各种核自旋极化的影响，我们还设计了一组配有辅助量子比特的极化预言机。为了将核自旋浴充分划分为适合量子设备性能的较小群组，我们通过使用少量原子核进行一系列初步考察来测试其能力。根据其性能，我们可以通过真实量子设备与经典模拟器协作，或完全借助 IBMQ 的经典模拟器来模拟 FID过程。借助这种自适应分区方法，我们能够在横向极化核自旋浴存在的情况下重现非经典 FID过程，并估算相应的 CHER。值得注意的是，我们在量子计算机上的 AQS电路模型不受 Trotter 分解误差的影响。

为进一步展现我们方法的通用性，我们还将其用于研究量子比特间串扰所导致的非局域噪声中的非经典性。此类噪声是我们模拟中的主要误差来源，且难以通过对采集数据进行后处理来消除。我们的方法提出了一种便捷的串扰抑制方式：通过对浴进行最优分组并启动适当的量子比特。借助这些典型的模拟任务，我们展示了该方法的灵活性和能力，可用于探索模拟材料背后的新物理。

II. NV^- 中心的动力学

我们的方法秉承模拟量子模拟（AQS）的思想，通过操控一个受良好控制的量子系统的可调哈密顿量，以数值方式模拟一个较难控制的量子系统。我们的方法所采用的电路模型将根据目标材料的具体细节进行专门设计。因此，在解释量子电路的构建之前，有必要先阐明所要模拟的目标。

A. NV^- 中心的哈密顿量

我们考虑金刚石晶格中的一个带负电的氮-空位（NV^-）中心，它由替位氮（N）和相邻晶格位置上的空位（V）组成，如图1（a）所示。连接V与N的轴定义了电子自旋的固有 z 轴。在V位置总共束缚着六个电子，形成复杂的电子自旋构型。电子自旋的基态为自旋三重态，其 $S = 1$。图1（b）展示了电子自旋基态的能级结构。在子能级 $D/2\pi = 2.87$ 之间存在 $m_S = 0$ 和 $m_S = \pm1$之间的零场劈裂 $m_S = \pm1$ GHz。在没有外加磁场时，两个子能级由于塞曼效应而简并；施加外加磁场后，这种简并将因 B而解除$\vec{B} = B_z\vec{e}_z$ ，并假设外加磁场 z 与 $|0\rangle \leftrightarrow |\pm 1\rangle$ 轴对齐。由于塞曼劈裂，我们可以在适当频率下使用微波（MW）脉冲选择性地激发两种不同的自旋跃迁。因此，电子自旋三重态的自由哈密顿量为

$$\widehat{H}_{\mathrm{NV}} = D\widehat{S}_z^2 + \gamma_e B_z \widehat{S}_z, \tag{1}$$

其中， $\gamma_e/2\pi = 2.8025$ MHz/G 为电子旋磁比。

金刚石晶格位置大多被自旋为零的 ^{12}C 原子核占据 [（图1(c)], 中的浅灰色球体），它们对电子自旋自由感应衰减（FID）过程的影响可以忽略不计。电子自旋退相干主要由随机分布的 ^{13}C 同位素引起，其天然丰度约为 1.1% [（图1(c)]中的深灰色球体），其核自旋为 $J = 1/2$。那么，由编号为 ^{13}的 k C 同位素组成的核自旋浴的自由哈密顿量为

$$\widehat{H}_{\mathrm{C}} = \sum_k \gamma_{\mathrm{C}} B_z \widehat{J}_z^{(k)}, \tag{2}$$

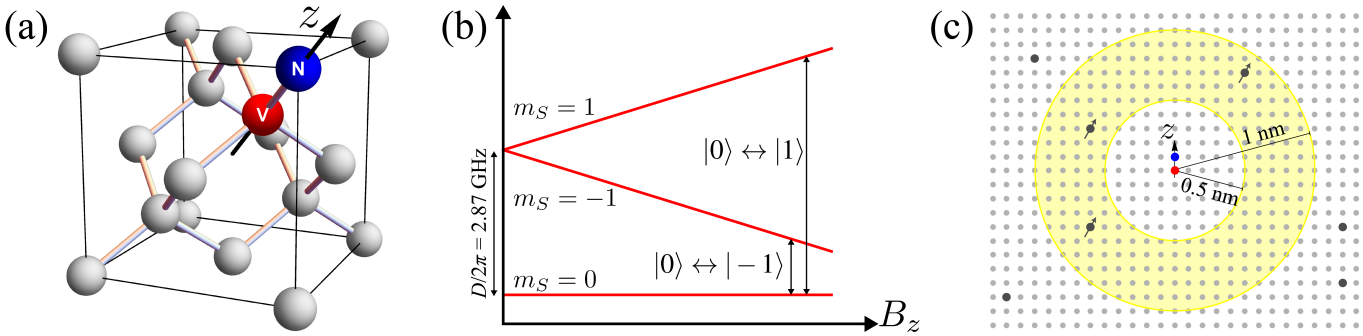


图 1. (a) 金刚石晶格中的 NV^- 中心是一种点缺陷，由替位氮（N）和相邻晶格位置上的空位（V）构成。连接 V 和 N 的轴定义了一条向禺 z 轴，外加磁场 $\vec{B} = B_z\vec{e}_z$ 沿该轴施加。(b) 对于电子自旋三重态基态，子能级 $m_S = 0$ 和 $m_S = \pm 1$之间存在 $D/2\pi = 2.87$ GHz 的零场劈裂。在外加磁场作用下，塞曼劈裂可解除 $m_S = \pm 1$ 之间的简并。随后，可用适当频率的微波脉冲选择性地驱动两个不同的自旋跃迁 $|0\rangle \leftrightarrow |\pm 1\rangle$，从而构成一个逻辑量子比特。(c) 金刚石晶格中的 NV^- 中心与 ^{13}C 核自旋浴（深灰色球体）相互作用的示意图。为确保偶极-偶极超精细相互作用成立，所有 ^{13}C 原子核均位于半径为 0.5 纳米的区域之外。此外，我们还假设，只有半径为 1 纳米的极化区域（黄色阴影）内的原子核，才能通过 DNP 技术以可控方式实现相同的极化。

其中 $\gamma_C/2\pi = 1.0704$ kHz/G 为 ^{13}C 原子核的旋磁比。

电子自旋与 ^{13}C 核自旋浴之间的耦合由超精细相互作用给出，其相互作用哈密顿量表示为

$$\hat{H}_I = \hat{S} \cdot \sum_k \vec{A}^{(k)} \cdot \hat{J}^{(k)}. \tag{3}$$

由于电子波函数紧密局域于 V 位点，远离 NV 中心超过 0.5 nm 的原子核与电子波函数重叠所产生的费米接触相互作用可以忽略不计$^-$。在模拟中，我们从随机生成的构型中后选择所有 ^{13}C 原子核均位于半径 0.5 nm 之外的构型，如图1(c) 示意。因此，超精细相互作用（3）由偶极-偶极相互作用引起，超精细系数为

$$A_{ij}^{(k)} = \frac{\mu_0 \gamma_e \gamma_C}{4\pi |\vec{r}^{(k)}|^3} \left[\vec{e}_i \cdot \vec{e}_j - 3(\vec{e}^{(k)} \cdot \vec{e}_i)(\vec{e}^{(k)} \cdot \vec{e}_j) \right], \tag{4}$$

其中 μ_0 为真空磁导率，$\vec{r}^{(k)}$ 为指向第 k 个原子核的位移矢量，$\vec{e}^{(k)}$ 为 $\vec{r}^{(k)}$ 的单位矢量。需要注意的是，由于 γ_e 与 γ_C 相差三个数量级，核间相互作用对自由感应衰减过程的影响可以忽略。簇相关展开技术也验证了这一点 [67, 68]。因此，我们在此忽略核间相互作用。

此外，值得注意的是，稀疏的 ^{13}C 核自旋浴使电子自旋的弛豫时间达到毫秒量级 T_1，而退相干时间则为微秒量级 T_2^* – [71。由于实验测得 T_1 与 T_2^*之间相差三个数量级，电子自旋动力学可很好地近似为纯退相干；在所研究的时间尺度内。因此，我们有必要^ ^忽略与 S_x 和 S_y 成正比的项，并在方程（3）^中仅从现象学角度考虑 S_z 分量。于是，总哈密顿量可表示为

$$\hat{H}_T = D\hat{S}_z^2 + \gamma_e B_z \hat{S}_z + \sum_k \gamma_C B_z \hat{J}_z^{(k)} + \hat{S}_z \sum_k \vec{A}_z^{(k)} \cdot \hat{J}^{(k)}, \tag{5}$$

并且仅剩下三个超精细系数 $\vec{A}_z^{(k)}$ =（$A_{zx}^{(k)}$、$A_{zy}^{(k)}$、$A_{zz}^{(k)}$）。此外，必须注意的是，总哈密顿量（5）相对于电子自旋基可表示为块对角形式：

$$\hat{H}_T = \sum_{m_S=0,\pm1} |m_S\rangle\langle m_S| \otimes \hat{H}_{m_S}, \tag{6}$$

其中 $\hat{H}_{m_S} = (m_S^2 D + m_S \gamma_e B_z) + \sum_k \vec{\Omega}_{m_S}^{(k)} \cdot \hat{J}^{(k)}$、$\vec{\Omega}_0^{(k)} = \vec{\Omega}_0 = (0、0、\gamma_C B_z)$，以及 $\vec{\Omega}_{\pm1}^{(k)} = \pm\vec{A}_z^{(k)} + \vec{\Omega}_{0}$。

最后，总幺正时间演化算符

$$\begin{aligned} \hat{U}_T(t) &= \exp(-i\hat{H}_T t) \\ &= \sum_{m_S=0,\pm1} |m_S\rangle\langle m_S| \otimes \hat{U}_{m_S}(t), \end{aligned} \tag{7}$$

相对于电子自旋^基同样是块对角的，其条件演化算符为 $U_{m_S}(t)$ =^$\exp(-iH_{m_S}t)$。

B. 电子自旋的FID过程

电子自旋的 FID 过程是由 ^{13}C 核自旋浴引起的纯退相干动力学。假设整个系统的初始态是一个直积

所有组成部分的乘积

$$\rho_{\rm T}(0)=\rho_{\rm NV}(0)\otimes\prod_k\rho^{(k)}, \tag{8}$$

其中，$\rho^{(k)}=[\hat{I}^{(k)}+\vec{p}^{(k)}\cdot\hat{\sigma}^{(k)}]/2$ 是第 k 个核自旋的初始态，其极化为 $\vec{p}^{(k)}$；$\hat{I}^{(k)}$ 和 $\hat{\sigma}^{(k)}$ 分别是作用于第 k 个核自旋希尔伯特空间的恒等算符和泡利算符。在传统的自由感应衰减实验中，首先用 532 纳米绿光激光器对电子自旋进行光学极化，使其达到 $|0\rangle$；随后施加一个 $\pi/2$ 微波脉冲，将电子自旋态制备为叠加态 $|\Psi_{\rm NV}(0)\rangle=(|0\rangle+|1\rangle)/\sqrt{2}$。因此，在我们的模拟中，电子自旋被描述为一个量子比特流形，其希尔伯特空间由两个子能级 $m_S=0$ 和 $m_S=1$张成。

电子自旋态设为 $\rho_{\rm NV}(0)$ 后，方程（5）中的超精细相互作用开启，总系统的时间演化由分块对角幺正算符控制

$$\begin{aligned}\hat{U}_{\rm T}(t) &= |0\rangle\langle 0|\otimes\prod_k\hat{U}_0^{(k)}(t)\\ &\quad+|1\rangle\langle 1|\otimes e^{-i(D+\gamma_e B_z)t}\prod_k\hat{U}_1^{(k)}(t),\end{aligned} \tag{9}$$

其中 $\hat{U}_{(k)0}(t)=\exp[-i(\Omega_0\hat{\sigma}_z^{(k)})t/2]$，且 $\hat{U}_{(k)1}(t)=\exp[-i(\vec{\Omega}_1^{(k)}\cdot\hat{\sigma}^{(k)})t/2]$，而 $\vec{u}^{(k)}=\vec{\Omega}_1^{(k)}/|\vec{\Omega}_1^{(k)}|$ 是核自旋进动轴。

对总系统中的 ^{13}C 核自旋浴取迹，可得到电子自旋约化密度矩阵 $\rho_{\rm NV}(t)=\mathrm{Tr}_{\rm C}\hat{U}_{\rm T}(t)\rho_{\rm T}(0)\hat{U}^{\dagger}{}_{\rm T}(t)$；电子自旋的纯退相干动力学由退相干因子刻画

$$\begin{aligned}\phi(t) &= \langle 0|\rho_{\rm NV}(t)|1\rangle\\ &= e^{i(D+\gamma_e B_z)t}\prod_k\mathrm{Tr}\left[\hat{U}_1^{(k)\dagger}(t)\hat{U}_0^{(k)}(t)\rho^{(k)}\right].\end{aligned} \tag{10}$$

此外，由于我们特别关注由 ^{13}C 核自旋浴引起的纯退相干动力学，因此很明显，前置因子 $\exp[i(D+\gamma_e B_z)t]$对于描述 $\phi(t)$的轮廓不起作用，只是引入了一个快速旋转相位。因此，就我们的目的而言，可以忽略这个前置因子。最后，借助关系式 $(\vec{u}\cdot\hat{\sigma})(\vec{v}\cdot\hat{\sigma})=(\vec{u}\cdot\vec{v})I+i(\vec{u}\times\vec{v})\cdot\hat{\sigma}$ 以及恒等算符与泡利算符的正交性 $\mathrm{Tr}\hat{\sigma}_j\hat{\sigma}_k=2\delta_{jk}$，退相干因子可以解析地表示为

$$\begin{aligned}\phi(t)=\prod_k\Bigg[&\left(\cos\frac{\Omega_0 t}{2}-ip_z^{(k)}\sin\frac{\Omega_0 t}{2}\right)\cos\frac{\Omega_1^{(k)}t}{2}\\ &+u_z^{(k)}\left(\sin\frac{\Omega_0 t}{2}+ip_z^{(k)}\cos\frac{\Omega_0 t}{2}\right)\sin\frac{\Omega_1^{(k)}t}{2}\\ &+i\left(p_x^{(k)}u_x^{(k)}+p_y^{(k)}u_y^{(k)}\right)\cos\frac{\Omega_0 t}{2}\sin\frac{\Omega_1^{(k)}t}{2}\\ &+i\left(p_x^{(k)}u_y^{(k)}-p_y^{(k)}u_x^{(k)}\right)\sin\frac{\Omega_0 t}{2}\sin\frac{\Omega_1^{(k)}t}{2}\Bigg]\end{aligned} \tag{11}$$

C. 核自旋极化

方程（11）表明，可以通过调控核自旋浴的极化 $\vec{p}^{(k)}$ 和进动轴$\vec{u}^{(k)}$ 来操纵电子自旋的动力学行为。动态核极化（DNP）是核自旋浴工程中一种得到广泛发展的技术 [74–84], 该技术利用电子自旋与原子核之间的超精细相互作用和共振，将电子自旋的极化转移到周围的核自旋上，从而形成超极化核自旋浴。

另一方面，由于动态核极化的基本机制依赖于电子自旋与原子核之间的超精细相互作用，而这种相互作用会随着位移增大而迅速减弱，如方程（4）所示，因此通常无法极化整个核自旋浴。因此，我们假设只有位于半径为1纳米的极化区域内的原子核 [（图1（c）] 中的黄色阴影区域）才能被赋予相同的极化$\vec{p}$；否则 $\vec{p}=0$ 对于 $\vec{r}^{(k)}\geq 1$ 纳米。

III. 动力学过程非经典性

根据以上讨论，我们得知，电子自旋的退相干是由超精细相互作用与 ^{13}C 核自旋浴之间的作用引起的。事实上，退相干现象在任何量子系统中都普遍存在，因为系统不可能与其环境完全隔离，而与环境不可避免的相互作用正是退相干的根源 [85–90]。从量子信息理论视角来看，这些相互作用会在系统与环境之间建立复杂的关联；然而，巨大的环境中的涨落会破坏这些关联，使其变得脆弱而短暂。

因此，一个引人深思的问题自然浮现出来：仅凭自由感应衰减信号，实验人员能够在多大程度上推断出电子自旋与核自旋浴之间关联的本质？为此，我们开发了一种

正则哈密顿量系综表示（CHER），根据主系统与其环境之间非经典关联的见证来刻画非动力学过程的非经典性 [62–64]。

我们对过程非经典性的定义建立在这样一种可能性之上：以系综平均方式解释一个动力学过程。在我们的定义中具有根本重要性的数学工具是哈密-ˆ顿量系综（HE） $\{(p_\lambda,\ H_\lambda)\}_\lambda$，它由一ˆ组无迹厄米算符 $H_\lambda \in \mathfrak{su}(n)$ 及其发生 p_λ 的概率 [91, 92]构成。对于给定的哈密顿量系综，它将产生如下表示的系综平均动力学:

$$\bar{\rho}(t) = \mathcal{E}_t\{\rho(0)\} = \int p_\lambda \widehat{U}_\lambda(t)\rho(0)\widehat{U}_\lambda^\dagger(t)d\lambda, \tag{12}$$

ˆ ˆ其中，$U_\lambda(t) = \exp(-iH_\lambda t)$ 是由系综成员哈密顿算符⌢H_λ生成的幺正时间演化算符。

一个尤其具有启发性的例子是：考虑一个受到谱无序影响的单量子比特，其哈密顿量系综为$\{(p(\omega)\ \hat{\omega}\sigma_z/2)\}_\omega$，其中 $p(\omega)$ 可以是任意概率分布函数，那么系综平均动力学描述的就是纯退相干:

$$\begin{aligned}\bar{\rho}(t) &= \int_{-\infty}^{\infty} p(\omega)e^{-i\omega\hat{\sigma}_z t/2}\rho_0\, e^{i\omega\hat{\sigma}_z t/2}d\omega \\ &= \begin{bmatrix}\rho_{\uparrow\uparrow} & \rho_{\uparrow\downarrow}\,\phi(t)\\ \rho_{\downarrow\uparrow}\,\phi^*(t) & \rho_{\downarrow\downarrow}\end{bmatrix}\end{aligned} \tag{13}$$

其中，退相干因子 $\phi(t) = \int p(\omega)\exp(-i\omega t)d\omega$ 是 $p(\omega)$ 的傅里叶变换。

关键的是，已有研究表明 [62], ，如果主系统及其环境在任何时候都保持经典关联，并且在相互作用过程中没有产生非经典关联，那么约化系统动力学 $\mathcal{E}_t$ 就可以用系综平均动力学意义上的 HE 来解释（12）。也就是说，非相干动力学行为可以被视为经典关联消耗的结果。相反，如果相互作用过程中出现非经典关联，就可能无法构造出具有合法概率分布函数 p_λ的 HE，而必须转而采用取值为负的准分布 $\wp_\lambda$ 。因此，准分布 $\wp_\lambda$（称为 CHER）可用于表征动力学的非经典性 $\mathcal{E}_t$ [62–64]。

考虑由幺正算符（9）支配的 FID过程，电子自旋经历了以退相位因子（11）为特征的纯退相位动力学。根据方程（13），电子自旋 FID 所对应的 CHER $\wp(\omega)$ 由傅里叶逆变换确定

$$\wp(\omega) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\phi(t)e^{i\omega t}dt. \tag{14}$$

有趣的是，当 ^{13}C 核自旋浴处于横向极化状态时，电子自旋 FID 已显示出非经典性；此外，随着极化程度和磁场的增强，非经典性也会进一步增强 [65]。下面，我们将设计一种量子电路，用于重现核自旋路径极化对电子自旋 FID过程所诱导的非经典效应。

IV. 面向 NV$^-$ 中心的自适应分区AQS

阐明了要模拟的目标材料以及需要揭示的非经典性背后的物理机制后，我们接下来说明如何设计量子电路模型，以实现针对 NV$^-$ 中心与一个由大量 ^{13}C 核自旋构成的浴之间耦合的自适应分区AQS。整个流程包含以下几个步骤:

步骤 1 **AQS 量子电路**。由于总哈密顿量（5）将生成相应的幺正时间演化算符（9），我们的方法首先要设计一个实现式（9）的量子电路模型，并确定所有相关的实验设置，包括初态制备和核自旋极化。

步骤 2 **初步考察**。为了以 AQS 方式完整模拟整个核自旋浴的效应，量子电路需要运行数百个量子比特。这显然无法在近期量子计算平台上实现。因此，我们根据量子设备的性能，将浴自适应地划分为若干组。为此，第二阶段是通过测试第一阶段设计的原型量子电路，对现有量子设备的性能进行初步考察。

步骤 3 **自适应分区**。根据上一阶段考察的量子设备的限制，第三阶段是将核自旋浴划分为更小的组，以适应现有量子设备的性能。这样，每个独立的组都能在量子设备上实现，并可分别执行。

步骤 4 **组的组合**。最终，根据方程（11），可以将各组的输出合并，从而得到最终结果。

下面将详细说明各阶段的具体实现。

A. NV$^-$ 中心的 AQS 电路模型

AQS 的目的在于利用可控量子系统定制一个模拟目标系统的人工哈密顿量

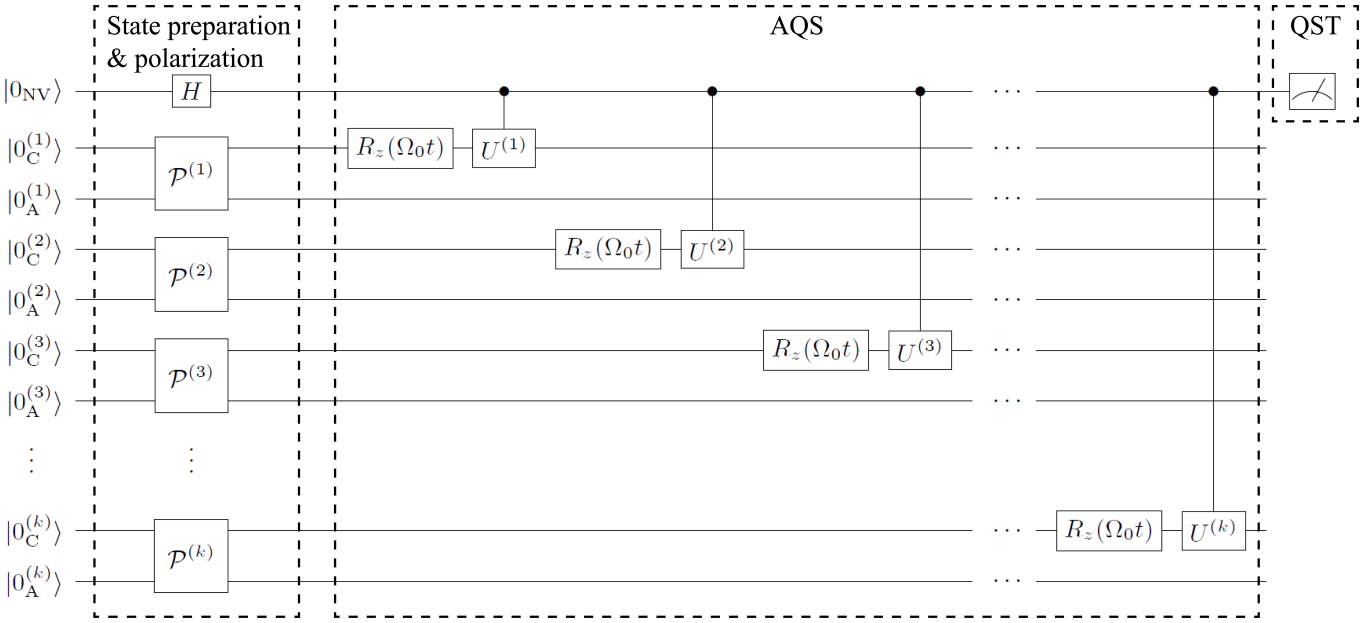


图 2. 实现 NV 的 AQS 的整体量子电路$^-$中心与整个 ^{13}C 核自旋浴耦合。为制备满足实验条件的量子比特初始态，每个量子比特都要经过一个态制备阶段。电子量子比特上的哈达玛门将量子比特态设置为 $(|0\rangle + \downarrow 1\rangle)/\sqrt{2}$，以反映 $\pi/2$ 微波脉冲的作用。核量子比特的混合态则可通过作用于与额外辅助量子比特相关联的第 $\mathcal{P}^{(k)}$ 个 k核量子比特上的极化预言机实现。所需的核自旋极化可通过表 I中列出的极化预言机实现。在电子量子比特末端，应用量子态层析，沿时间序列构建退相干因子 $\phi(t)$ 的时间演化。

表 I. 极化预言机和极化向量。

$\vec{p}^{(k)}$	(0, 0, 1)	(0, 0, 0)	(0,0, 余弦 θ)	(1,0, 0)	(sin θ_1 sin θ_2, 0, cos θ_1)
$\mathcal{P}^{(k)}$		H	$U(\theta,0,0)$	$U(\pi/2,\ 0,\ 0)$	$U(\theta_1,\ 0,\ 0)$
					$U(\theta_2,\ 0,\ 0)$

中的一个。因此，我们通过映射总的幺正时间演化算符来设计一个量子电路

$$\widehat{U}_{\mathrm{T}}(t) = |0\rangle\langle 0| \otimes \prod_k \widehat{U}_0^{(k)}(t) + |1\rangle\langle 1| \otimes \prod_k \widehat{U}_1^{(k)}(t) \quad (15)$$

转换为量子门。注意，式（$[-i\ (D + \gamma_e B_z)\ t]$ 中的因子 exp 已被忽略。该因子由电子自旋自由哈密顿量（ 1 ）所描述的 $|0\rangle$ 与 $|1\rangle$ 态之间的能级间距决定。它是自由感应衰减（FID）曲线快速振荡的原因。不过，这里我们关注的是与核自旋浴相互作用引起的退相位。因此，就我们的目的而言，可以忽略这个因子。

值得注意的是，式（5）中的超精细相互作用会产生一种由电子自旋态控制的内禀条件操作。在经过以下操作后，可通过 IBMQ 上的受控 U 门实现这一操作：

对式（15）进行如下操作：

$$\widehat{U}_{\mathrm{T}}(t) = \left(|0\rangle\langle 0| \otimes \prod_k \widehat{I}^{(k)} + |1\rangle\langle 1| \otimes \prod_k \widehat{U}_1^{(k)}(t)\widehat{U}_0^{(k)\dagger}(t)\right) \times \left(\widehat{I}^{(\mathrm{NV})} \otimes \prod_k \widehat{U}_0^{(k)}(t)\right), \quad (16)$$

其中，$\widehat{I}^{(\mathrm{NV})}$ 是作用于充当电子自旋的量子比特上的恒等算符。然后，上述幺正算符可以通过量子门实现如下：

$$\widehat{U}_{\mathrm{T}} = \left(\mathrm{C}^{(\mathrm{NV})} \prod_k \widehat{U}^{(k)}(\theta^{(k)}, \varphi^{(k)}, \lambda^{(k)}, \gamma^{(k)})\right) \times \left(\widehat{I}^{(\mathrm{NV})} \otimes \prod_k \widehat{R}_z(\Omega_0 t)\right). \quad (17)$$

第二项表示一系列相同且相互独立的

^的 $R_z(\Omega_0 t)$ 旋转，其矩阵表示为

$$R_z(\theta) = e^{-i\frac{\theta}{2}\hat{\sigma}_z^{(k)}} = \begin{bmatrix} e^{-i\frac{\theta}{2}} & 0 \\ 0 & e^{i\frac{\theta}{2}} \end{bmatrix}, \tag{18}$$

作用于充当 ^{13}C 核自旋的量子比特上，随后是由第一项所表示的电子量子比特控制的受控 U 门。它们可以通过如下量子电路实现

$$U^{(k)} = e^{i\gamma^{(k)}} U(\theta^{(k)}, \varphi^{(k)}, \lambda^{(k)}) \tag{19}$$

在 IBMQ 上；与此同时，门参数可根据哈密顿量（6）确定如下：

$$\begin{cases} \theta^{(k)} = 2\cos^{-1}\sqrt{\cos^2\frac{\Omega_1^{(k)}t}{2} + \sin^2\frac{\Omega_1^{(k)}t}{2}u_z^{(k)2}} \\ \varphi^{(k)} = -\frac{\pi}{2} - \Theta^{(k)} + \Phi^{(k)} \\ \lambda^{(k)} = \frac{\pi}{2} - \Omega_0 t - \Theta^{(k)} - \Phi^{(k)} \\ \gamma^{(k)} = \frac{\Omega_0 t}{2} + \Theta^{(k)} \\ \Theta^{(k)} = \mathrm{Arg}\left[\cos\frac{\Omega_1^{(k)}t}{2} - i\sin\frac{\Omega_1^{(k)}t}{2}u_z^{(k)}\right] \\ \Phi^{(k)} = \mathrm{Arg}\left[u_x^{(k)} + iu_y^{(k)}\right] \end{cases}. \tag{20}$$

更多详情见附录 A。因此，总幺正时间演化算符（15）可由下方简洁展示的 AQS 电路实现：

$$U_{\mathrm{T}}(t) = \mathrm{AQS}\ R_z(\Omega_0 t)\ U(k) \tag{21}$$

B. 态制备与极化预言机

根据第 II 节的讨论，一旦总幺正时间演化算符（15）已由量子电路实现，下一步便是根据 FID 实验制备式（8）所给出的初始态。

IBMQ 上的量子比特初始态预设为 $|0\rangle$。哈达玛门可实现 $\pi/2$ 微波脉冲的效果，将电子自旋态设为 $(|0\rangle + |1\rangle)/\sqrt{2}$，如图2所示。另一方面，仅对核量子比特施加单量子比特门，不足以实现各种核自旋态，尤其是混合态。为此，我们设计了极化预言机 $\mathcal{P}^{(k)}$，作用于与额外辅助量子比特相关联的第 k个核量子比特上，如图2所示。经过适当的 $\mathcal{P}^{(k)}$操作后，对辅助量子比特进行偏迹，即可使核量子比特处于态 $\rho^{(k)} = [\hat{I}^{(k)} + \vec{p}^{(k)} \cdot \hat{\sigma}^{(k)}]/2$，其对应的极化向量为 $\vec{p}^{(k)}$。表I 展示了一个极化预言机族 $\mathcal{P}^{(k)}$ 及对应的极化向量 $\vec{p}^{(k)}$。因此，我们可以操控各个核量子比特态，并实现一个实验条件下的核自旋浴，其示意图如图1(c)所示。

在 AQS 量子电路末端，采用量子态层析（QST）来探测电子量子比特的状态。此外，由于我们的目标是模拟由退相干因子（11）表征的电子自旋纯退相干，因此可以按照 σ_x 和 σ_y，沿时间序列测量来构建其时间演化，依据 $\phi(t) = \langle\hat{\sigma}_x\rangle_t - i\langle\hat{\sigma}_y\rangle_t$。最后，电路的整体布局如图 2 所示。请注意，在 AQS 量子电路末端进行 QST 时，仅测量电子量子比特。AQS 模块之后，核自旋和辅助量子比特均被忽略。这体现了对式（10）中核自旋自由度取迹。

C. 初步考察

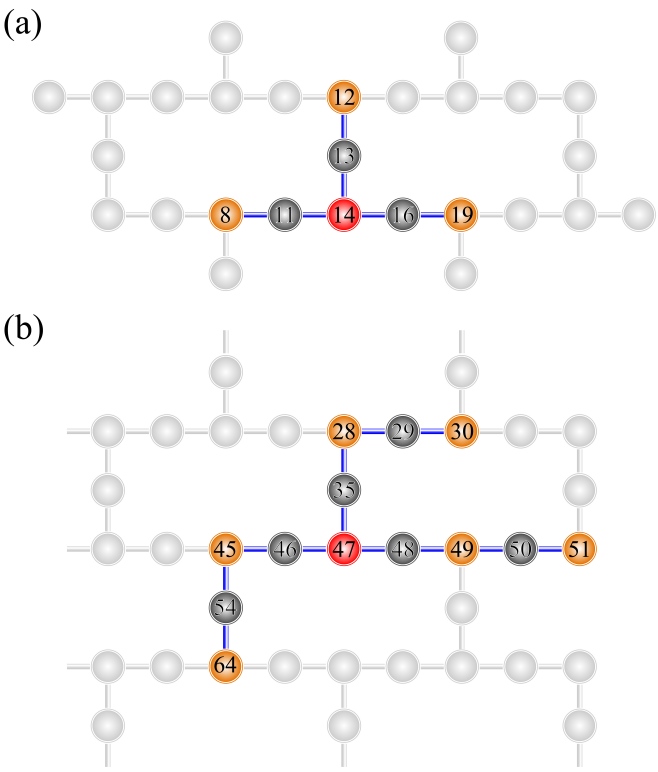


图 3. 在 (a) ibm auckland 和 (b) IBM 华盛顿量子设备上进行模拟时使用的量子比特。红色、深灰色和橙色量子比特分别充当电子自旋、核自旋以及控制核自旋极化的辅助量子比特。

要在 IBMQ 上执行 AQS 量子电路 [66]，，我们必须将量子电路映射到量子设备的量子比特上。然而，由于量子比特拓扑连接性的限制，将用于模拟数百个核量子比特的整个量子电路映射到 IBMQ 设备上显然不可行。

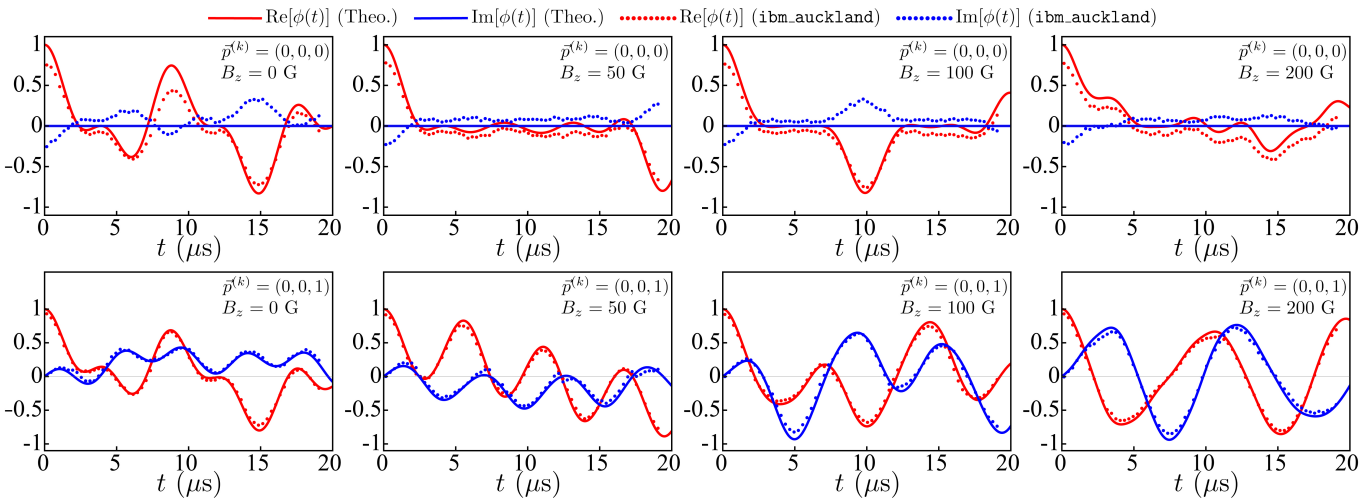


图 4. 从 ibm auckland 获得的三个原子核的 AQS 结果。我们展示了不同磁场下两种极化的结果：$\vec{p}^{(k)}=(0,\ 0,\ 0)$（上方图板）和 $\vec{p}^{(k)}=(0,\ 0,\ 1)$（下方图板）。由于极化对应于预设的量子比特态 $|0\rangle$，无需额外操作，因此 $\vec{p}^{(k)}=(0,\ 0,\ 1)$ 的模拟结果与理论计算吻合良好。另一方面，制备核自旋极化 $\vec{p}^{(k)}=(0,\ 0,\ 0)$ 需要一个 CNOT 门，导致明显的偏差，尤其是虚部 $\mathrm{Im}[\phi(t)]$ 出现错误。

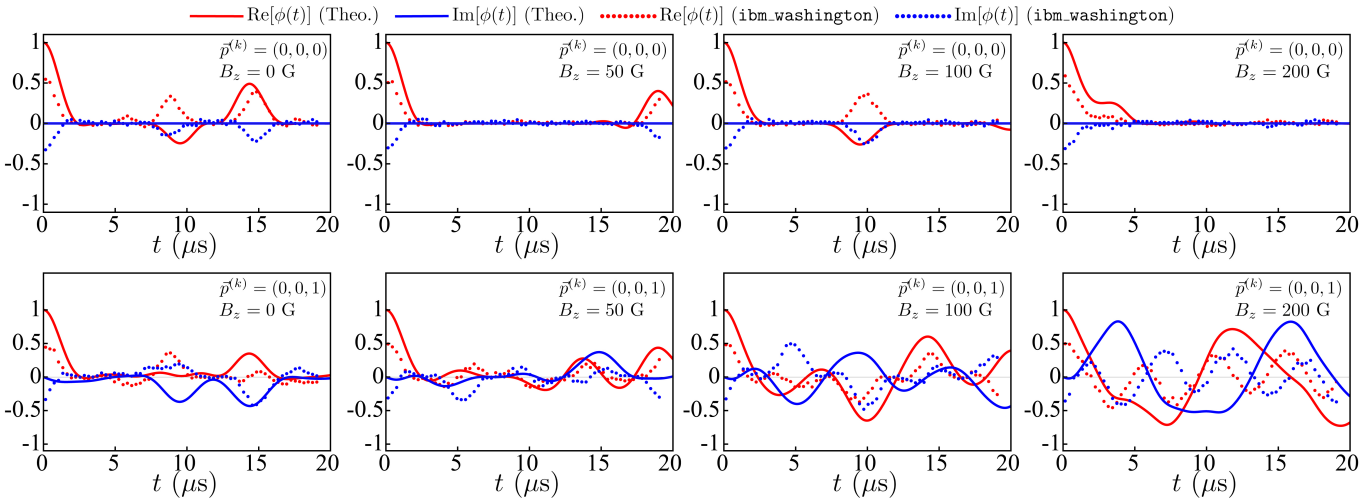


图 5. 从 IBM 华盛顿获得的六个原子核的 AQS 结果。我们展示了不同磁场下两种极化的结果：$\vec{p}^{(k)}=(0,\ 0,\ 0)$（上方图板）和 $\vec{p}^{(k)}=(0,\ 0,\ 1)$（下方图板）。由于 IBMQ 设备的拓扑连接性限制，超过三个的核量子比特会位于距离电子量子比特更远的位置，从而导致 CNOT 门数量迅速增加。这不仅会加剧噪声，还会加深量子电路，使模拟结果不可靠。

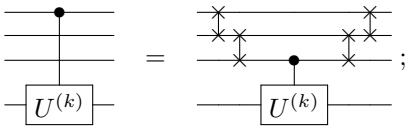
为了验证该量子电路的有效性，并为后续用途评估 IBMQ 设备的性能，我们首先执行两个原型电路，分别模拟三个和六个 ^{13}碳原子核在`ibm auckland` 和 IBM 华盛顿上的效应。IBM Q设备上启用的量子比特及其标签如图 3所示。红色量子比特承担电子自旋的作用，深灰色和橙色量子比特则分别表示原子核以及用于控制核自旋极化的辅助量子比特。

图4和5 展示了典型

分别对三个和六个原子核进行模拟。我们展示了两种极化，即 $\vec{p}^{(k)}=(0,\ 0,\ 0)$ 和 $(0,\ 0,\ 1)$ 在不同磁场值下的结果。在图4中，从 `ibm auckland`获得的 $\vec{p}^{(k)}=(0,\ 0,\ 1)$（底部面板）结果与公式（11）给出的理论计算结果吻合良好；而 $\vec{p}^{(k)}=(0,\ 0,\ 0)$（顶部面板）的结果则显示出显著差异。这些差异可以从两个方面理解。第一方面是表 I 中列出的极化预言机。极化 $\vec{p}^{(k)}=(0,\ 0,\ 1)$ 对应于预设的量子比特态 $|0\rangle$，无需额外

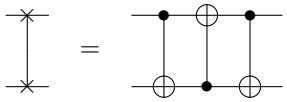
操作。然而，$\vec{p}^{(k)}=(0,0,0)$ 的情况要求为每个核量子比特额外连接一个辅助量子比特的 CNOT 门，这构成了 IBMQ 设备中噪声的一个来源。随后，我们将进一步研究由 IBMQ 设备中量子比特间串扰引起的非局域噪声的第二个来源。我们将发现，这种非局域噪声同样是非经典的，并且构成误差的主要来源，尤其是错误的虚部 $\mathrm{Im}[\phi(t)]$。

此外，我们还将原子核的数量增加到六个，并在图 5 中展示了结果。可以看出，IBM 华盛顿 获得的结果与理论计算的偏差更为显著。这种偏差增大的原因可从 IBMQ 设备的拓扑连接性中理解。如图 3(b) 所示，一个电子量子比特最多可与三个核量子比特直接物理连接，每个核量子比特还连接着一个辅助量子比特。更远处的核量子比特与电子量子比特之间的距离更远，因此需要使用远程受控 U 门。由于连接性有限，后端会通过添加额外的 SWAP门来实现远程受控 U 门，如下所示：



(22)

每个 SWAP 门都会额外引入三个 CNOT 门，如下所示：



(23)

这会导致后端实现中 CNOT 门的数量迅速增加，同时也会带来有害噪声。此外，CNOT 门数量增加还意味着量子电路更深，需要更长的执行时间，可能接近甚至超过物理量子比特的寿命，从而使结果变得不可靠。

最后，我们还在ibmq qasm 模拟器上对十个原子核进行了 AQS。我们发现，模拟器的结果与理论计算非常吻合，仅存在由经典模拟算法所引入的近似导致的微小误差；然而，该模拟器的计算能力有限，在单个任务中最多只能模拟十对原子核-辅助量子比特对的效应。结果和进一步讨论见附录B。

D. 浴的自适应分区

从先前的初步考察可以看出，单个任务中模拟的原子核数量非常有限，远不足以通过 AQS 方式模拟大规模材料。为克服这些限制，我们设计了一种模拟算法，通过自适应地将核自旋浴划分为若干组，使每组都能适配量子设备的性能。

在我们的模拟中，我们首先生成一个天然丰度约为 1.1% 的核自旋构型，其中包含 520 个^{13}C 原子核，它们随机分布在金刚石晶格位置上。随后，我们按照原子核与电子自旋之间的距离 $|\vec{r}^{(k)}|$ 由近及远排列。为确保式（4）所描述的偶极-偶极相互作用有效，我们还验证了所有原子核与电子自旋的距离均大于 0.5 nm。

表II展示了我们如何对520个原子核进行划分。例如，第一行表示一组由三个处于极化区域内的原子核组成的群组（$0.5 < |\vec{r}^{(k)}| < 1$ nm）。随后，可在ibmauckland 上利用一个启动七个量子比特的量子电路来模拟该效应[图3(a)]，，并且极化向量 $\vec{p}^{(k)}$ 可通过表I中列出的适当极化预言机进行控制。在我们的配置中，有十个原子核位于极化区域内。对于极化区域外具有 $\vec{p}^{(k)}=(0,0,0)$的非极化原子核，例如由范围从 ♯11 到 ♯20的原子核组成的群组，量子电路在ibmq qasm 模拟器上进行模拟。

随后，整个核自旋浴的效应通过 IBMQ 上的真实设备ibmauckland 与模拟器ibmq qasm 模拟器 协同实现。最后，根据式（11），计及520个原子核的目标退相干因子 $\phi(t)$ 由所有群组结果的乘积给出，相应的 CHER $\wp(\omega)$ 可根据傅里叶逆变换（14）进行估计。

V. 模拟结果

我们首先在图6 中展示未极化核自旋浴的结果，即 $\vec{p}^{(k)}=(0,0,0)$。图中彩色点表示在ibmauckland 上模拟的十个原子核以及在ibmq qasm 模拟器上模拟的外部原子核。正如图4上方面板所预期的那样，我们可以在图6中观察到显著误差，尤其是在时间演化的初期。作为对比研究，我们还展示了完全在ibmq qasm 模拟器上进行的对应结果，以彩色圆圈表示。尽管该模拟器的结果优于协同模拟的结果，但由于对所有原子核组的乘积所导致的放大，算法误差如今在虚部中变得明显。

在图6下方各图中，我们展示了相应的 CHER $\wp(\omega)$ 在不同磁场下的结果。理论计算表明，对于未极化的核自旋浴，CHER 应为正值；而由ibmauckland 引起的误差则导致出现负翼。鉴于负性可作为非经典系统的判据，

表 II. 520个原子核的划分及各组的实现方式。

k	$\lvert\vec{r}^{(k)}\rvert$ (纳米)	$\vec{p}^{(k)}$	设备	^{13}C的数量	量子比特数量
♯1-♯3	$0.5 \sim 1$	可控	ibm_auckland	3	7
♯4-♯6	$0.5 \sim 1$	可控	ibm_auckland	3	7
♯7-♯9	$0.5 \sim 1$	可控	ibm_auckland	3	7
♯10	$0.5 \sim 1$	可控	ibm_auckland	1	3
♯11-♯20	> 1	(0, 0, 0)	ibmq qasm 模拟器	10	21
♯21-♯30	> 1	(0, 0, 0)	ibmq qasm 模拟器	10	21
⋮					
♯511-♯520	> 1	(0, 0, 0)	ibmq qasm 模拟器	10	21

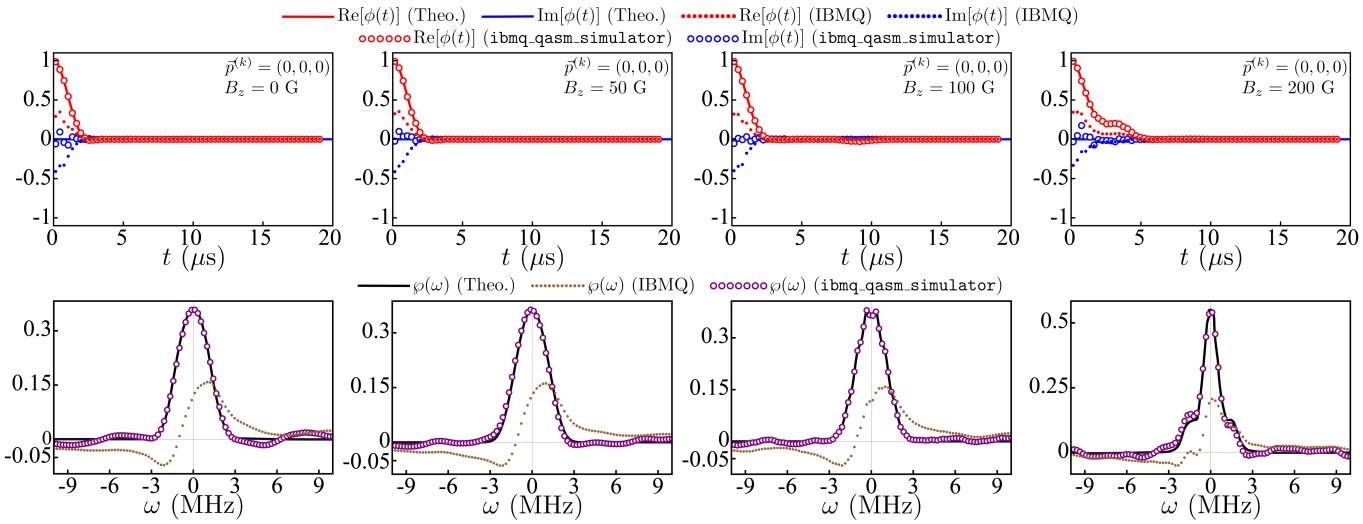


图 6. 520 个非极化原子核在不同磁场（上排图）下的自适应分区 AQS 结果，以及相应的 CHER（下排图）。与 ibm auckland 和 ibmq qasm 模拟器协同进行的模拟结果以彩色点表示，而完全由 ibmq qasm 模拟器得出的结果以彩色圆圈表示。ibm auckland 引起的误差十分显著，尤其是在时间演化的初始阶段。除虚部中的算法误差被放大外，模拟器给出的结果更好。尽管非极化核自旋浴情况下的 CHER 应为正值，但 ibm auckland 上的串扰所引起的误差导致出现负翼。另一方面，完全由 ibmq qasm 模拟器得出的结果很好地再现了中心峰；而算法误差则导致中心峰两侧出现不规则的波浪状翼。

环境关联 [62], 这些负翼表明，在脉冲操作期间，原子核-辅助超导设备与衬底中的环境自由度之间形成了某些非经典且非局域的关联。这种效应称为原子核-辅助量子比特对之间的串扰，并导致量子比特对之间出现非局域噪声；这些噪声进而影响电子自旋量子比特的动力学，并体现在 CHER 中的负性上。稍后我们将讨论如何通过采用适当的量子比特对来抑制其影响。另一方面，ibmq qasm 模拟器给出的结果很好地再现了中心峰。然而，算法误差会导致中心峰两侧出现不规则的波状负翼。

在图7中，我们展示了 z极化的核自旋浴的效应。类似地，彩色圆点表示

以协作方式进行模拟，其中带有 $\vec{p}^{(k)} = (0,\ 0,\ 1)$ 极化的十个原子核在ibmauckland 上进行模拟，而外部的非极化原子核则在ibmq qasm 模拟器 上进行模拟，具体划分如表II所列；彩色圆圈表示完全在ibmq qasm 模拟器上执行的对应部分。正如初步考察所预期的那样，针对 $\vec{p}^{(k)} = (0,\ 0,\ 1)$ 的 IBMQ 协作模拟结果明显优于针对 $\vec{p}^{(k)} = (0,\ 0,\ 0)$ 的结果，这是由于相应的极化预言机所致。此外，完全由ibmq qasm 模拟器 给出的结果也与理论计算高度吻合，尽管虚部中存在明显的算法误差。进一步而言，在这种情况下，随着磁场增强，CHER 的轮廓发生剧烈变化。在强磁场下会出现几个尖锐峰。值得注意的是，我们的模拟也很好地复现了这一现象。

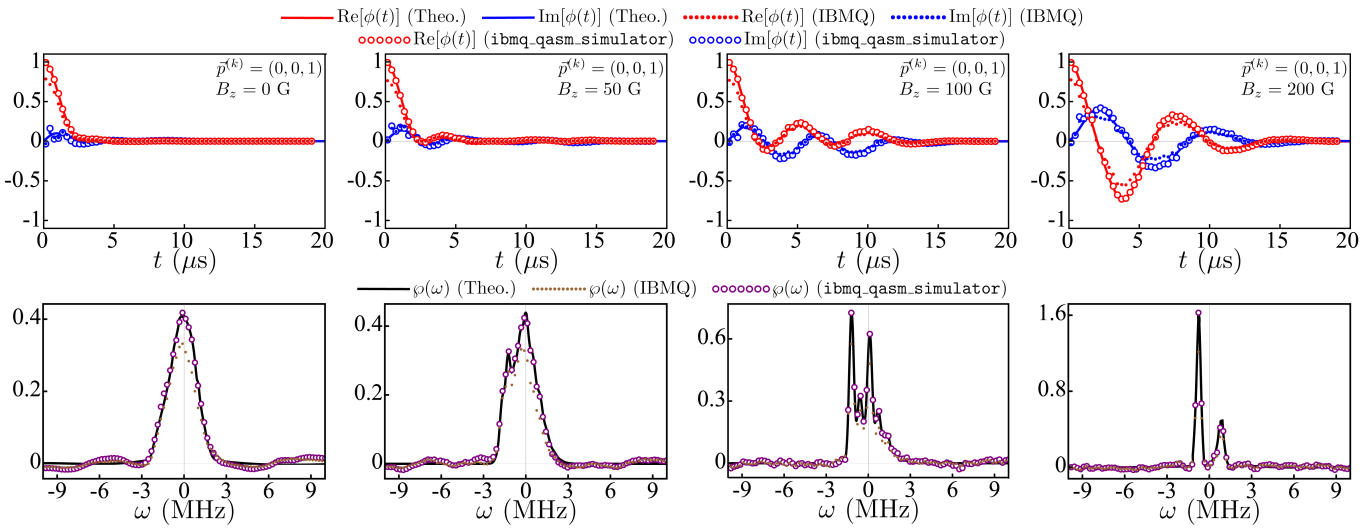


图 7. 在磁场取不同值时， z 极化核自旋浴的自适应分区 AQS 结果（上图）及其相应的 CHER（下图）。与 ibm auckland 和 ibmq qasm 模拟器协同进行的模拟以彩色点表示，而完全由 ibmq qasm 模拟器执行的模拟以彩色圆圈表示。由于实现 $\vec{p}^{(k)} = (0, 0, 1)$ 的极化预言机执行空操作，协同模拟结果与理论计算吻合良好。值得注意的是，CHER 曲线中尖锐峰的出现也在我们的模拟中得到了良好重现。

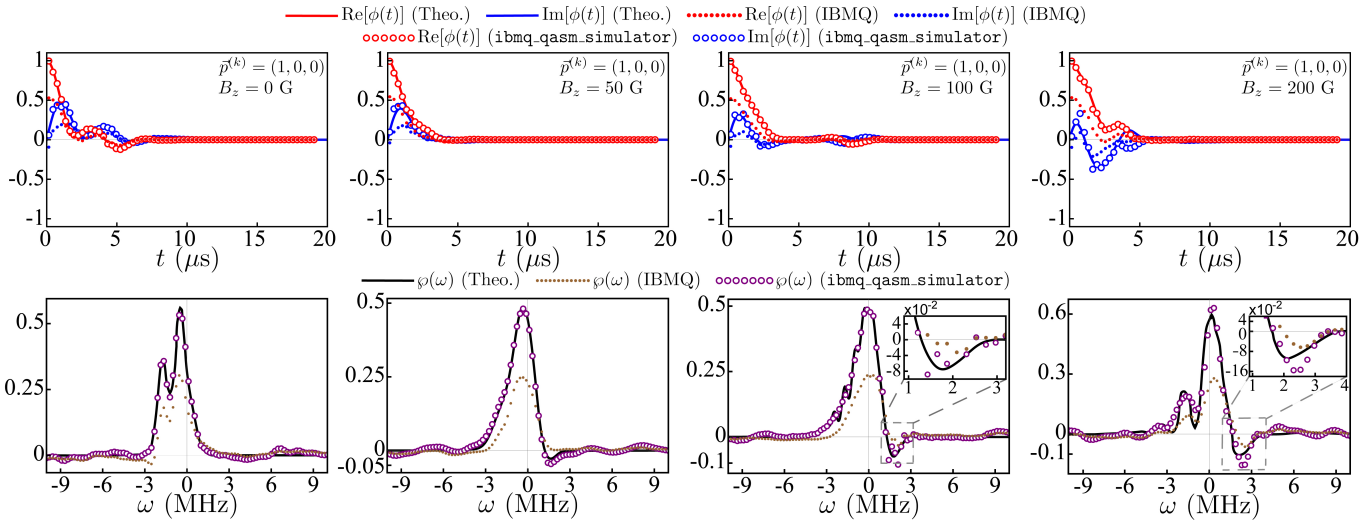


图 8. 在磁场取不同值时， x 极化核自旋浴的自适应分区 AQS 结果（上图）及其相应的 CHER（下图）。与 ibm auckland 和 ibmq qasm 模拟器协同进行的模拟以彩色点表示，而完全由 ibmq qasm 模拟器执行的模拟以彩色圆圈表示。由于 ibm auckland 上实现 $\vec{p}^{(k)} = (1, 0, 0)$ 的极化预言机，协同模拟结果最终显著偏离理论计算。在这种情况下，完全由 ibmq qasm 模拟器执行的模拟也受到放大的算法误差影响。值得注意的是，在较强磁场下，CHER 中的负性 $\wp(\omega)$ 对误差的抵抗能力增强并变得可见，如插图所示。这表明我们的模拟重现了非经典性。

已有研究表明，在存在横向极化的核自旋浴时，核自旋的进动会诱导非经典性 [65]。图8 展示了在不同磁场值下，由 x-极化核自旋浴诱导的非经典性的模拟结果。实现 $\vec{p}^{(k)} = (1, 0, 0)$ 的极化预言机需要在核量子比特上施加一个量子门

被极化。在所有 x极化核量子比特上放大产额后，协作模拟中的误差变得ibm auckland尤为明显；不过整体轮廓仍然可见。同样，完全由ibmq qasm 模拟器给出的结果也受到放大的算法误差影响。值得注意的是，在图8的下方面板中，我们可以观察到非经典性的出现

其表现为 CHER $\wp(\omega)$ 中的负性。尽管由于 ibm auckland 上的误差，非经典性在$B_z = 50$ G 时变得模糊，但在更强的磁场下则清晰可见，如$B_z = 100$ G 和 200 G 对应的插图所示。

VI. 量子比特间非经典串扰

从前述模拟结果可以看出，除了门误差或量子比特有限寿命等内禀局域误差外，我们的模拟还受到另一种非局域噪声的影响，即量子比特间串扰，而这正是阻碍模拟数值可靠性的主要因素。

为解决串扰导致的非局域噪声问题，我们在 [13] ibm auckland 上执行原型电路，模拟两个 C 原子核在不同原子核-辅助量子比特对上运行的效果。图9展示了 $\vec{p}^{(k)} = (0,\ 0,\ 0)$ 在不同磁场值下的结果。插图标出了电路中运行的量子比特。可以看出，在左右量子比特对 [图 9(a)]上运行电路，能够显著抑制串扰导致的噪声。结果与理论计算吻合良好。值得注意的是，零虚部 Im$[\phi(t)]$的结果得到了正确复现；而在右上方量子比特对 [图 9(c)] 上运行电路，则会产生最显著的错误虚部。此外，误差的变化与图 4上面板中观察到的情况相同。这些初步模拟不仅证实了串扰对错误虚部的影响，还表明通过选择合适的量子比特运行电路，可以方便地抑制这种影响。

基于这些初步模拟，我们应用自适应分区方法来模拟520个原子核的影响。图10展示了在不同磁场值下，启动不同原子核-辅助量子比特对时 $\vec{p}^{(k)} = (0, 0, 0)$的结果，如插图所示。同样，彩色圆点表示与 ibm auckland 和 ibmq qasm 模拟器协同完成的结果，彩色圆圈表示使用 ibmq qasm 模拟器进行模拟的结果。与图 6 顶部面板中模拟的 FID过程相比，左右量子比特对给出的结果 [图10(a)]有了显著改善。理论计算与实部 Re$[\phi(t)]$ 及虚部 Im$[\phi(t)]$之间的偏差大幅减小，这与图 9(a)的预期一致。另一方面，左上方 [图10(b)] 或右上方量子比特对 [图10(c)] 给出的结果会受到串扰噪声的影响，导致实部或虚部出现明显偏差。

值得注意的是，CHER $\wp(\omega)$ 还能进一步揭示串扰效应的不同见解。将左右量子比特对给出的 CHER 与 [图10(a)] 图6底部面板中所示的结果进行比较，可以发现，由于串扰受到抑制，左侧错误的负翼以及右侧的正翼均被消除。仅剩由模拟器算法误差引起的不规则波状翼。

另一方面，左上方量子比特对[图 10(b)]和右上方量子比特对 [图 10(c)] 所给出的 CHER 显示出错误的负翼，表明串扰效应具有非经典本质。另一个值得注意的现象是，不同量子比特对所导致的错误负翼位置也各不相同。这意味着，串扰在空间分离的超导设备波函数之间诱导的相对相位具有不同的符号。

VII. 结论

在本研究中，我们提出在近期量子计算平台上以模拟量子模拟的方式模拟大规模材料。鉴于噪声和拓扑连接性对计算能力造成的限制，我们的模拟算法根据量子设备的性能，将巨大浴的影响自适应地划分为适当的组，从而绕过这些障碍。

我们通过模拟 NV^- 中心电子自旋的自由感应衰减过程来展示我们的方法。该电子自旋与一个庞大的核自旋浴耦合，并在 IBMQ 上进行模拟。我们设计了一种原型量子电路，通过偶极-偶极超精细相互作用，实现 NV^- 中心与大量原子核耦合的总哈密顿量。此外，为了反映实验条件，我们还设计了一系列极化预言机，以实现基于 DNP技术的核自旋工程。

为考察量子设备模拟电子自旋动力学的能力，我们还进行了一系列初步考察，模拟少量原子核所产生的影响。根据其表现，我们可以与真实设备和经典模拟器协同，或完全借助 IBMQ 的经典模拟器来模拟自由感应衰减过程。采用这种自适应分区方法，我们能够重现自由感应衰减过程中由 520个原子核产生的影响。具体而言，我们考虑了实验条件下不同的磁场值和核自旋极化。此外，借助 CHER 技术，我们的方法还能够重现由核自旋极化引发的电子自旋自由感应衰减过程的非经典本质。

此外，我们还注意到，模拟结果会受到真实量子器件噪声和模拟器算法误差的影响。为进一步展示我们方法的通用性，我们还将其用于解决模拟中的主要误差来源，即量子比特间串扰造成的非局域噪声，以及其

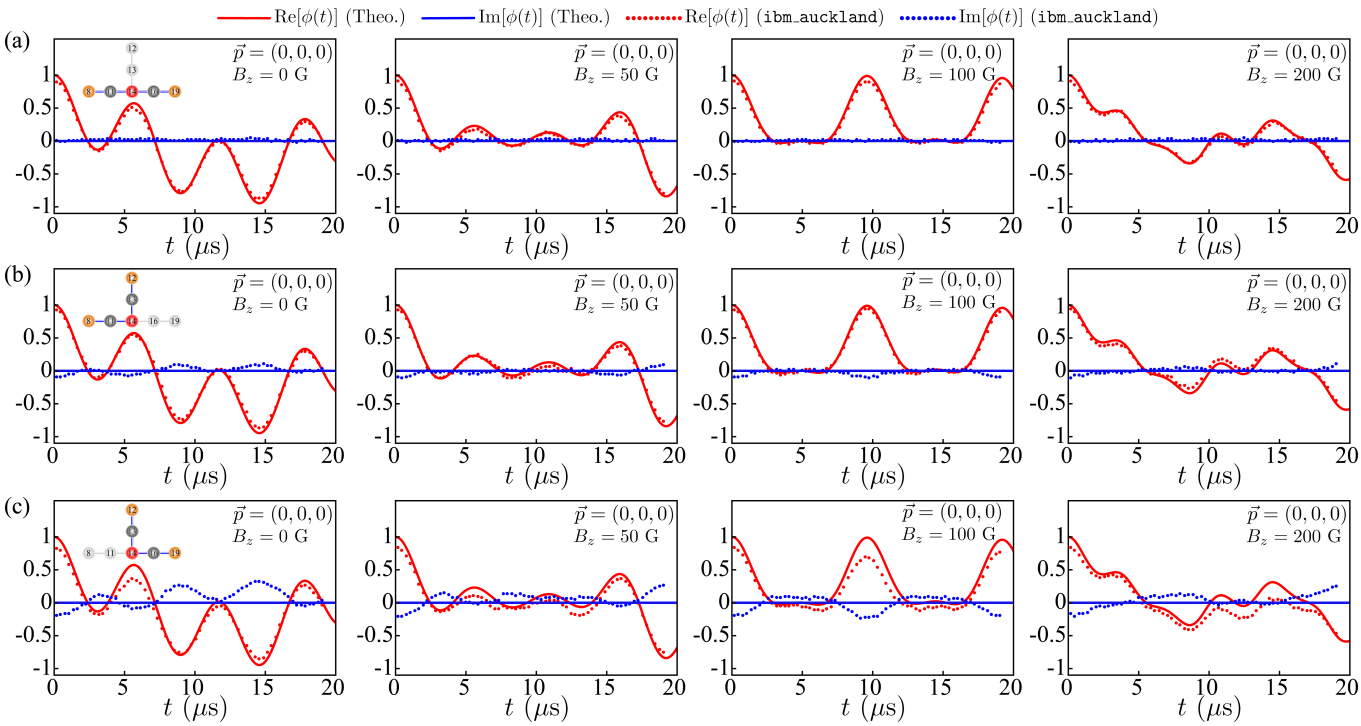


图 9. 通过从 ibm auckland 启动（a）左右、（b）左上和（c）右上量子比特对，分别获得的两个原子的 AQS 结果，如插图所示。仅启动左右量子比特对即可显著抑制串扰。相应结果与理论计算高度一致，尤其是虚部为零。然而，由左上和右上量子比特对给出的结果受到串扰所引起噪声的影响。这些噪声在错误的虚部中尤为明显。

非经典本质。我们的分析表明，通过启动适当的量子比特，可以方便地抑制这种噪声。

总之，我们展示了自适应分区方法在微观层面探索模拟现象背后的物理机制方面的能力。我们的方法再现了关键的物理现象，包括电子自旋的动力学行为、CHER 轮廓的变化、以 CHER 中的负性表示的非经典性，以及至关重要的、由量子比特间串扰所引起噪声中的非经典性。需要强调的是，我们的方法具有灵活性：为提高效率，在单个任务中，我们不仅可以将计算负载分配给不同的设备，还可以将其分配给同一设备上的不同量子比特组。也就是说，分配策略可以根据可用设备的状况以及所需的准确性或效率进行调整。

(≡ $\widehat{\Phi}\omega\widehat{\Phi}$ ≡) ∼ 喵

致谢

我们感谢 NTU-IBM Q 中心和 IBM 量子体验平台为我们提供平台，以实作量子电路—现这些量子电路。文中观点仅代表作者立场，并不反映 IBM 或 IBM 量子体验平台团队的官方政策或立场。本研究由台湾国家科学及技术委员会资助，资助编号为 MOST 110-2112-M-006-012 和 MOST 111-2112-M-006-015-MY3；部分经费来自教育部对国立成功大学校务发展基金会的高等教育深耕计划，以及台湾国家理论科学研究中心。

附录 A：AQS 量子电路中受控 U 门的参数

这里说明如何确定式（$\theta^{(k)}$，$\varphi^{(k)}$，$\lambda^{(k)}$，$\gamma^{(k)}$）中受控 U 门的门参数。17。

在 IBMQ 上要进行控制的 U 门的矩阵形式表示为

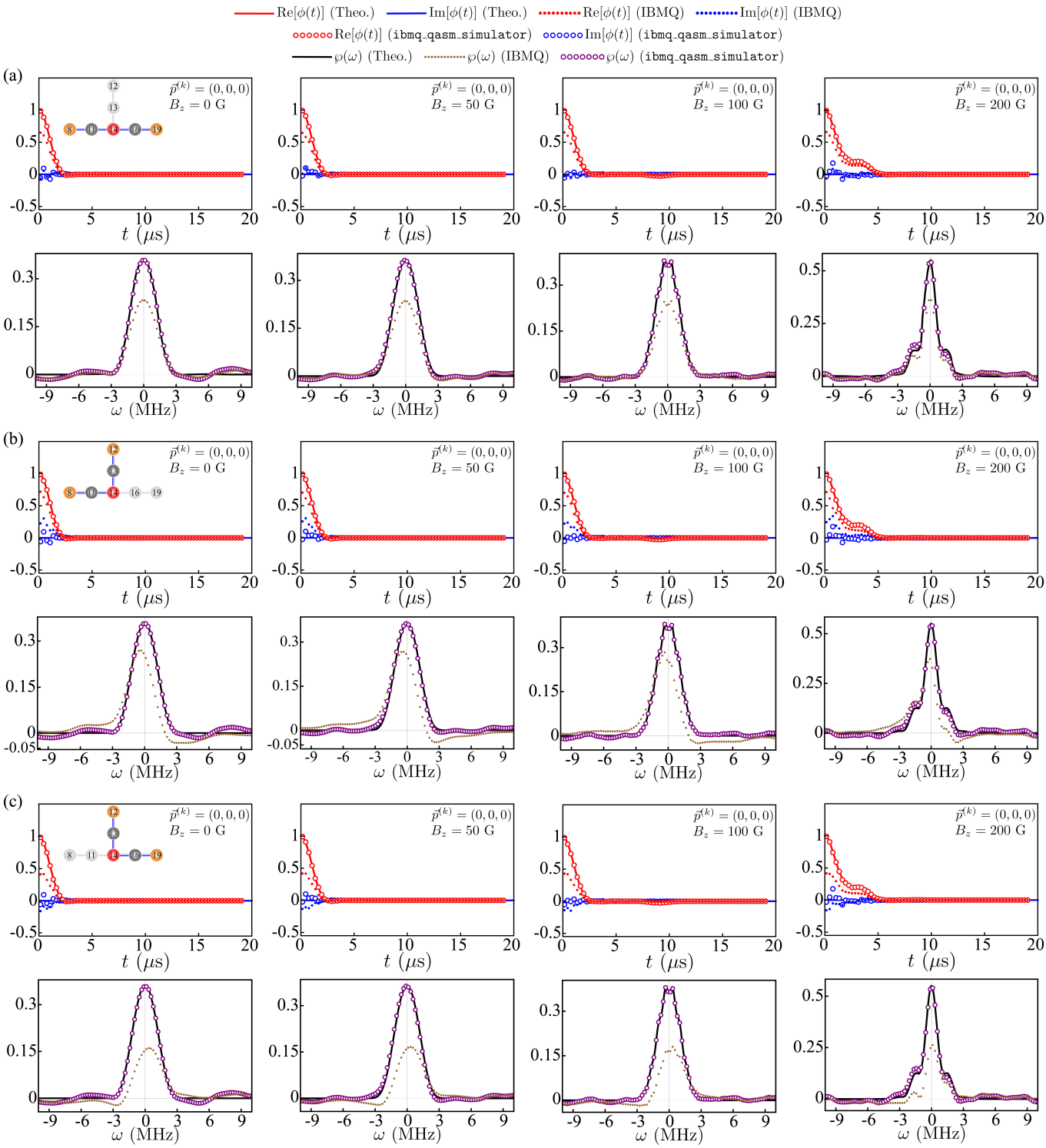


图10. 在不同磁场值下，对520个非极化原子核进行自适应分区AQS所得的结果及其对应的CHER。彩色圆点分别表示在 ibm auckland 上使用（a）左右量子比特对、（b）左上量子比特对和（c）右上量子比特对，以协作方式执行所得的结果，以及在 ibmq qasm 模拟器上所得的结果。左右量子比特对给出的结果表现出显著改进，从而消除了相应CHER中的错误翼。然而，左上或右上量子比特对给出的结果会受到串扰所引起噪声的影响，导致实部或虚部出现明显偏差，以及相应CHER中的错误翼。此外，串扰引起的负翼表明了其非经典特性。

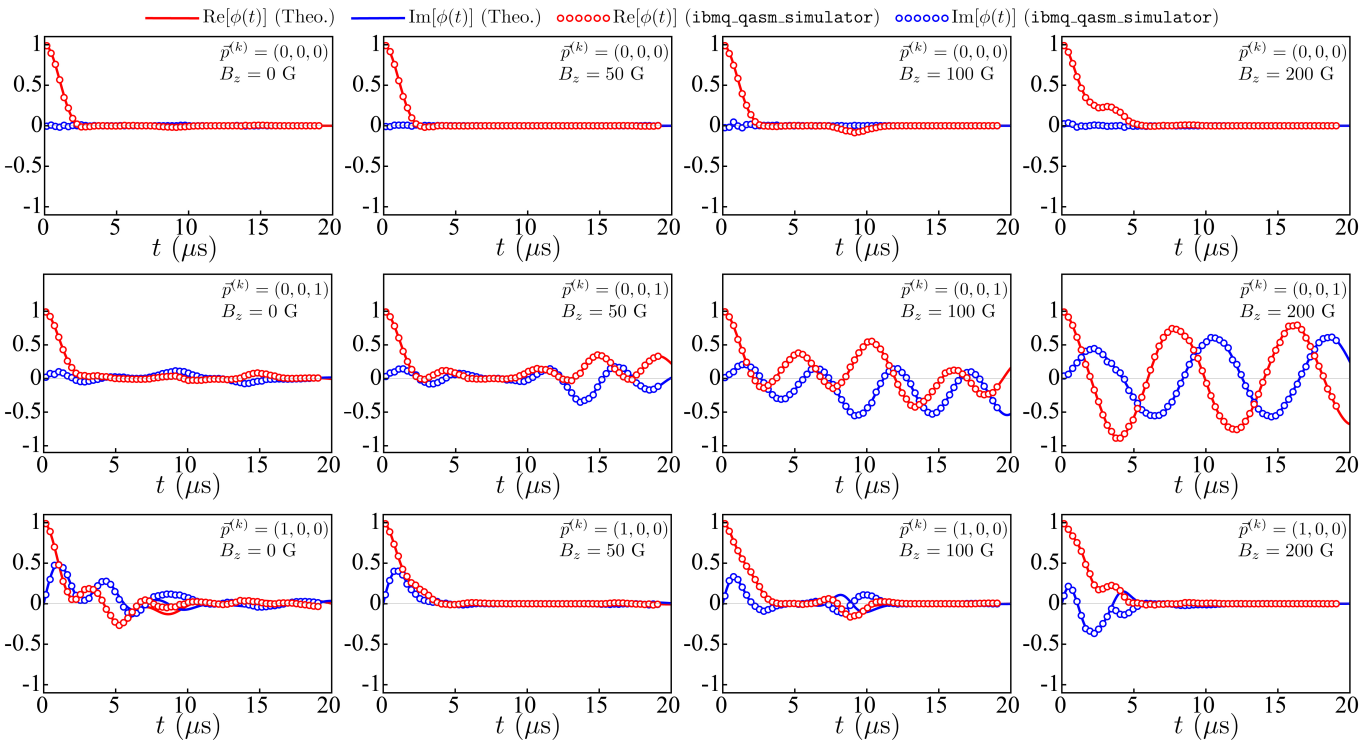


图11. 使用 IBM QASM 模拟器获得的十个原子核的 AQS 结果。我们展示了磁场取不同值时三种极化状态的结果：$\vec{p}^{(k)} = (0,\ 0,\ 0)$（上方图组）、$\vec{p}^{(k)} = (0,\ 0,\ 1)$（中间图组）和 $\vec{p}^{(k)} = (1,\ 0,\ 0)$（下方图组）。我们发现，经典模拟器 IBM QASM 模拟器在单个任务中最多可模拟十对原子核-辅助量子比特对。尽管量子比特数量受到限制，除经典模拟算法造成的微小误差外，结果与理论计算非常吻合。

$$e^{i\gamma^{(k)}}\widehat{U}(\theta^{(k)},\varphi^{(k)},\lambda^{(k)}) = e^{i\gamma^{(k)}}\begin{bmatrix}\cos\frac{\theta^{(k)}}{2} & -e^{i\lambda^{(k)}}\sin\frac{\theta^{(k)}}{2}\\ e^{i\varphi^{(k)}}\sin\frac{\theta^{(k)}}{2} & e^{i(\lambda^{(k)}+\varphi^{(k)})}\cos\frac{\theta^{(k)}}{2}\end{bmatrix}. \tag{A1}$$

另一方面，它与总哈密顿量的关系为

$$\begin{aligned}
&e^{i\gamma^{(k)}}\widehat{U}(\theta^{(k)},\varphi^{(k)},\lambda^{(k)}) = \widehat{U}_1^{(k)}(t)\widehat{U}_0^{(k)\dagger}(t) = \exp[-i(\vec{\Omega}_1^{(k)}\cdot\hat{\sigma}^{(k)})t/2]\times\exp[i(\Omega_0\hat{\sigma}_z^{(k)})t/2]\\
&= \begin{bmatrix}\cos\frac{\Omega_1^{(k)}t}{2} - i\sin\frac{\Omega_1^{(k)}t}{2}u_z^{(k)} & -i\sin\frac{\Omega_1^{(k)}t}{2}(u_x^{(k)}-iu_y^{(k)})\\ -i\sin\frac{\Omega_1^{(k)}t}{2}(u_x^{(k)}+iu_y^{(k)}) & \cos\frac{\Omega_1^{(k)}t}{2} + i\sin\frac{\Omega_1^{(k)}t}{2}u_z^{(k)}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}e^{i\frac{\Omega_0 t}{2}} & 0\\ 0 & e^{-i\frac{\Omega_0 t}{2}}\end{bmatrix}\\
&= e^{i\left(\frac{\Omega_0 t}{2}+\Theta^{(k)}\right)}\begin{bmatrix}\sqrt{\cos^2\frac{\Omega_1^{(k)}t}{2}+\sin^2\frac{\Omega_1^{(k)}t}{2}u_z^{(k)2}} & -e^{i\left(\frac{\pi}{2}-\Omega_0 t-\Theta^{(k)}-\Phi^{(k)}\right)}\sin\frac{\Omega_1^{(k)}t}{2}\sqrt{u_x^{(k)2}+u_y^{(k)2}}\\ e^{i\left(-\frac{\pi}{2}-\Theta^{(k)}+\Phi^{(k)}\right)}\sin\frac{\Omega_1^{(k)}t}{2}\sqrt{u_x^{(k)2}+u_y^{(k)2}} & e^{i\left(-\Omega_0 t-2\Theta^{(k)}\right)}\sqrt{\cos^2\frac{\Omega_1^{(k)}t}{2}+\sin^2\frac{\Omega_1^{(k)}t}{2}u_z^{(k)2}}\end{bmatrix},
\end{aligned} \tag{A2}$$

其中 $\Omega_0 = \gamma_C B_z$，$\vec{\Omega}_1^{(k)} = \vec{A}_z^{(k)} + \vec{\Omega}_0$，$\vec{u}^{(k)} = \vec{\Omega}_1^{(k)}/|\vec{\Omega}_1^{(k)}|$，$\Theta^{(k)} = \mathrm{Arg}[\frac{\Omega_1^{(k)}t}{2} - i\frac{\Omega_1^{(k)}t}{2}u_z^{(k)}]$，且 $\Phi^{(k)} = \mathrm{Arg}[u_x^{(k)} + iu_y^{(k)}]$。通过比较上述方程，我们得到式（20）中的结果。

附录 B：在模拟器上模拟十个原子核

受拓扑连接性的限制，在 IBMQ 实际设备上通过单个任务模拟大型材料并不可行。为克服这一限制，同时评估 IBMQ 提供的经典模拟器的能力，我们还在 IBM QASM 模拟器上运行了规模更大的原型电路。

尽管 IBM QASM 模拟器提供 32 个量子比特，但我们发现，其计算能力有限，最多只能模拟十对原子核-辅助量子比特对（单个任务中启动 21 个量子比特）。如果单个任务中包含超过 21 个量子比特，后端操作就会出错。这一限制可以从大小为 2^{21}，的巨大希尔伯特空间来理解，它对应于维度为 $2^{21}\times 2^{21}$ 的密度矩阵的传播。

在图 11 中，我们展示了十个 ^{13}C 原子核在 IBM QASM 模拟器上的影响的典型模拟结果。可以看出，模拟器给出的结果符合理论计算对三种极化的描述非常准确。然而，由于经典模拟算法引入了近似，仍存在微小误差。

[1] R. P. Feynman, 《用计算机模拟物理》, 《国际理论物理杂志》21，467（1982）。[2] J. T. Barreiro, M. M¨uller, P. Schindler, D. Nigg, T. Monz, M. Chwalla, M. Hennrich, C. F. Roos, P. Zoller, and R. Blatt, 《采用囚禁离子的开放系统量子模拟器》, 《自然》470，486（2011）。[3] I. M. Georgescu, S. Ashhab, and F. Nori, 《量子模拟》, 《现代物理评论》86，153（2014）。[4] F. Tacchino, A. Chiesa, S. Carretta, and D. Gerace, 《作为通用量子模拟器的量子计算机：最新进展与展望》, Adv. Quantum Tech- nol. 3，1900052（2020）。[5] A. J. Daley, I. Bloch, C. Kokail, S. Flannigan, N. Pearson, M. Troyer, and P. Zoller, 《量子模拟中的实用量子优势》, 《自然》607，667（2022）。[6] J. yoon Choi, S. Hild, J. Zeiher, P. Schauß, A. Rubio- Abadal, T. Yefsah, V. Khemani, D. A. Huse, I. Bloch, and C. Gross, 《探索二维多体局域化转变》, 《科学》352，1547（2016）。[7] J. Arg¨uello-Luengo, A. Gonz´alez-Tudela, T. Shi, P. Zoller, and J. I. Cirac, 《模拟量子化学模拟》, 《自然》574，215（2019）。[8] J. Braum¨uller, M. Marthaler, A. Schneider, A. Stehli, H. Rotzinger, M. Weides, and A. V. Ustinov, 《超强耦合区间内拉比模型的模拟量子模拟》, 《自然·通讯》8，779（2017）。[9] P. Roushan, C. Neill, J. Tangpanitanon, V. M. Bastidas, A. Megrant, R. Barends, Y. Chen, Z. Chen, B. Chiaro, A. Dunsworth, A. Fowler, B. Foxen, M. Giustina, E. Jef- frey, J. Kelly, E. Lucero, J. Mutus, M. Neeley, C. Quin- tana, D. Sank, A. Vainsencher, J. Wenner, T. White, H. Neven, D. G. Angelakis, and J. Martinis, 《超导量子比特中相互作用光子局域化的光谱特征》, 《科学》358，1175（2017）。[10] J. S. C. Hung, J. H. Busnaina, C. W. S. Chang, A. M. Vadiraj, I. Nsanzineza, E. Solano, H. Alaeian, E. Rico, and C. M. Wilson, 《利用参数腔对玻色Creutz梯子进行量子模拟》, 《物理评论快报》127，100503（2021）。[11] I. Bloch, J. Dalibard, and S. Nascimb`ene, 《利用超冷量子气体进行量子模拟》, 《自然·物理》8，267（2012）。[12] H. Labuhn, D. Barredo, S. Ravets, S. de L´es´eleuc, T. Macrì, T. Lahaye, and A. Browaeys, 《用于实现量子伊辛模型的可调二维单个里德伯原子阵列》, 《自然》534，667（2016）。[13] H. Bernien, S. Schwartz, A. Keesling, H. Levine, A. Om- ran, H. Pichler, S. Choi, A. S. Zibrov, M. Endres, M. Greiner, V. Vuleti´c, and M. D. Lukin, 《在51原子量子模拟器上探测多体动力学》, 《自然》551，579（2017）。[14] R. Islam, E. Edwards, K. Kim, S. Korenblit, C. Noh, H. Carmichael, G.-D. Lin, L.-M. Duan, C.-C. Joseph Wang, J. Freericks, and C. Monroe, 《囚禁离子量子模拟器中的量子相变起始》, 《自然·通讯》2，377（2011）。[15] R. Blatt 和 C. F. Roos, “用囚禁离子进行量子模拟”, 《自然·物理》8，277（2012）。[16] J. Zhang、G. Pagano、P. W. Hess、A. Kyprianidis、P. Becker、H. Kaplan、A. V. Gorshkov、Z.-X. Gong 和 C. Monroe, “利用53量子比特量子模拟器观测多体动力学相变”, 《自然》551，601（2017）。[17] B. Pokharel、N. Anand、B. Fortman 和 D. A. Lidar, “演示利用超导量子比特进行动态去耦以提升保真度”, 《物理评论快报》121，220502（2018）。[18] K. Wright、K. M. Beck、S. Debnath、J. M. Amini、Y. Nam、N. Grzesiak、J.-S. Chen、N. C. Pisenti、M. Chmielewski、C. Collins、K. M. Hudek、J. Mizrahi、J. D. Wong-Campos、S. Allen、J. Apisdorf、P. Solomon、M. Williams、A. M. Ducore、A. Blinov、S. M. Kreike-meier、V. Chaplin、M. Keesan、C. Monroe 和 J. Kim, “对11量子比特量子计算机进行基准测试”, 《自然·通讯》10，5464（2019）。[19] Y. Chen、M. Farahzad、S. Yoo 和 T.-C. Wei, “IBM量子计算机上的探测器层析及不完美测量的缓解”, 《物理评论A辑》100，052315（2019）。[20] G. A. L. White、C. D. Hill、F. A. Pollock、L. C. L. Hollenberg 和 K. Modi, “在量子处理器上演示非马尔可夫过程表征与控制”, 《自然·通讯》11，6301（2020）。[21] H.-Y. Ku、N. Lambert、F.-J. Chan、C. Emary、Y.-N. Chen 和 F. Nori, “对云端非宏观实在论猫态的实验检验”, 《npj量子信息》6，98（2020）。[22] Y.-T. Huang、J.-D. Lin、H.-Y. Ku 和 Y.-N. Chen, “对量子设备上的量子态传输进行基准测试”, 《物理评论研究》3，023038（2021）。[23] U. Skosana 和 M. Tame, “在 IBM 量子处理器上演示 Shor 的因数分解算法，适用于 n $= 21$ ”, 《科学报告》11，16599（2021）。[24] L. M. Seifert、K. Beyer、K. Luoma 和 W. T. Strunz, “IBM量子处理器上的量子导引”, 《物理评论A辑》105，042413（2022）。[25] F.-J. Chan、Y.-T. Huang、J.-D. Lin、H.-Y. Ku、J.-S. Chen、H.-B. Chen 和 Y.-N. Chen, “纯退相干噪声下的麦克斯韦双妖引擎”, 《物理评论A辑》106，052201（2022）。[26] A. Smith、M. S. Kim、F. Pollmann 和 J. Knolle, “在当前数字量子计算机上模拟量子多体动力学”, 《npj量子信息》5，106（2019）。[27] G. Garc´ía-P´erez、M. A. C. Rossi 和 S. Maniscalco, “IBM Q体验作为模拟开放量子系统的多功能实验测试平台”, 《npj量子信息》6，1（2020）。[28] L. Del Re、B. Rost、A. F. Kemper 和 J. K. Freericks, “晶格上的驱动耗散量子力学：在量子计算机上模拟费米子储库”, 《物理评论B辑》102，125112（2020）。[29] H. Kamakari、S.-N. Sun、M. Motta 和 A. J. Minnich,

“利用量子虚时间演化进行开放量子系统的数字量子模拟”，PRX Quan-tum 3，010320（2022）。[30] J. Preskill，“NISQ 时代及其之后的量子计算”，Quantum 2，79（2018）。[31] F. Arute *et al.*，“利用可编程超导处理器实现量子霸权”，《自然》574，505（2019）。[32] P. Jurcevic *et al.*，“在超导量子计算系统上展示64的量子体积”，Quantum Sci. Technol. 6，025020（2021）。[33] Y. Kim、A. Eddins、S. Anand、K. X. Wei、E. van den Berg、S. Rosenblatt、H. Nayfeh、Y. Wu、M. Zaletel、K. Temme 和 A. Kandala，“量子计算在实现容错之前已具实用价值的证据”，《自然》618，500（2023）。[34] B. Bauer、D. Wecker、A. J. Millis、M. B. Hastings 和 M. Troyer，“用于关联材料的量子-经典混合方法”，《物理评论X辑》6，031045（2016）。[35] H. Ma、M. Govoni 和 G. Galli，“在近期量子计算机上进行材料量子模拟”，《npj计算材料》6，85（2020）。[36] S. Lu、M. C. Ba˜nuls 和 J. I. Cirac，“有限能量下量子模拟的算法”，PRX Quantum 2，020321（2021）。[37] A. Peruzzo、J. McClean、P. Shadbolt、M.-H. Yung、X.-Q. Zhou、P. J. Love、A. Aspuru-Guzik 和 J. L. O’Brien，“光子量子处理器上的变分本征值求解器”，《自然·通讯》5，4213（2014）。[38] P. J. J. O’Malley *et al.*，“分子能量的可扩展量子模拟”，《物理评论X辑》6，031007（2016）。[39] M. Cerezo、A. Arrasmith、R. Babbush、S. C. Benjamin、S. Endo、K. Fujii、J. R. McClean、K. Mitarai、X. Yuan、L. Cincio 和 P. J. Coles，“变分量子算法”，《自然·物理评论》3，625（2021）。[40] L. M. Sieberer、T. Olsacher、A. Elben、M. Heyl、P. Hauke、F. Haake 和 P. Zoller，“数字量子模拟、Trotter误差与踢顶模型的量子混沌”，《npj量子信息》5，78（2019）。[41] M. Heyl、P. Hauke 和 P. Zoller，“量子局域化界限制数字量子模拟中的Trotter误差”，《科学进展》5，eaau8342（2019）。[42] N. M. Myers、R. Scott、K. Park 和 V. W. Scarola，“ 量子多体晶格模型 Suzuki-Trotter 分解的量子模拟成本”，《物理评论研究》5，023199（2023）。[43] L. E. Ballentine，“量子力学的统计诠释”，《现代物理评论》42，358（1970）。[44] W. H. Zurek，“退相干、选择性与经典的量子起源”，《现代物理评论》75，715（2003）。[45] M. Schlosshauer，“退相干、测量问题与量子力学诠释”，《现代物理评论》76，1267（2005）。[46] K. Modi、A. Brodutch、H. Cable、T. Paterek 和 V. Vedral，“关联的经典-量子边界：量子失谐及相关度量”，《现代物理评论》84，1655（2012）。[47] N. Brunner、D. Cavalcanti、S. Pironio、V. Scarani 和 S. Wehner，“贝尔非定域性”，《现代物理评论》86，419（2014）。[48] D. Cavalcanti 和 P. Skrzypczyk，“量子导引：侧重半定规划的综述”，Rep. Prog. Phys. 80

[49] R. Horodecki、P. Horodecki、M. Horodecki 和 K. Horodecki，《量子纠缠》，《现代物理评论》81，865（2009）。[50] E. P. Wigner，《关于热力学平衡的量子修正》，《物理评论》40，749（1932）。[51] R. J. Glauber，《辐射场的相干态与非相干态》，《物理评论》131，2766（1963）。[52] E. C. G. Sudarshan，《统计光束的半经典描述与量子力学描述的等价性》，《物理评论快报》10，277（1963）。[53] S. Rahimi-Keshari、T. Kiesel、W. Vogel、S. Grandi、A. Za- vatta 和 M. Bellini，《量子过程的非经典性》，《物理评论快报》110，160401（2013）。[54] K. K. Sabapathy，《量子光学通道的过程输出非经典性与非经典性深度》，《物理评论A辑》93，042103（2016）。[55] J.-H. Hsieh、S.-H. Chen 和 C.-M. Li，《量子力学过程的量化》，《科学报告》7，13588（2017）。[56] A. Smirne、D. Egloff、M. G. D´ıaz、M. B. Plenio 和 S. F. Huelga，《量子马尔可夫过程的相干性与非经典性》，Quantum Sci. Technol. 4，01LT01（2019）。[57] S. Milz、F. Sakuldee、F. A. Pollock 和 K. Modi，《（量子）因果建模与一般概率理论的柯尔莫戈洛夫扩张定理》，Quantum 4，255（2020）。[58] S. Milz、D. Egloff、P. Taranto、T. Theurer、M. B. Plenio、A. Smirne 和 S. F. Huelga，《何时非马尔可夫量子过程是经典的？》，《物理评论X》10，041049（2020）。[59] A. Seif、Y.-X. Wang 和 A. A. Clerk，《区分量子与经典的马尔可夫退相位耗散》，《物理评论快报》128，070402（2022）。[60] D. Chru´sci´nski、S. Hesabi 和 D. Lonigro，《多能级自旋-玻色子模型中的马尔可夫性与经典性》，《科学报告》13，1518（2023）。[61] A. A. Budini，《量化耗散型开放量子动力学中的环境非经典性》，《物理评论A辑》108，042203（2023）。[62] H.-B. Chen、C. Gneiting、P.-Y. Lo、Y.-N. Chen 和 F. Nori，《利用哈密顿量系综模拟开放量子系统及其动力学的非经典性》，《物理评论快报》120，030403（2018）。[63] H.-B. Chen、P.-Y. Lo、C. Gneiting、J. Bae、Y.-N. Chen 和 F. Nori，《量化纯退相位的非经典性》，《自然·通讯》10，3794（2019）。[64] H.-B. Chen 和 Y.-N. Chen，《退相位动力学的典范哈密顿量系综表示及热涨落对量子到经典转变的影响》，《科学报告》11，10046（2021）。[65] M.-C. Lin、P.-Y. Lo、F. Nori 和 H.-B. Chen，《动态极化核自旋浴诱导的 NV 中心自由感应衰减进动非经典性》，J. Phys.: Condens. Matter 34，505701（2022）。[66] 《IBM 量子服务》，https://quantum-computing.ibm.com/services 。[67] W. Yang 和 R.-B. Liu，《有限尺寸自旋浴中量子比特退相干的量子多体理论：II. 系综动力学》，《物理评论B辑》79，115320（2009）。[68] D. Kwiatkowski、 ˙L. Cywi´nski 和 J. K. Korbicz，《与动态极化核环境相互作用的 NV 中心中客观性的出现》，《新物理学杂志》23

，024001 (2017)。

，043036 (2021)。

[69] D. A. Redman、S. Brown、R. H. Sands 和 S. C. Rand, “通过电子顺磁共振和四波混频光谱研究金刚石中氮-空位中心的自旋动力学与电子态”, 《物理评论快报》67，3420（1991）。[70] P. Neumann、N. Mizuochi、F. Rempp、P. Hemmer、H. Watanabe、S. Yamasaki、V. Jacques、T. Gaebel、F. Jelezko 和 J. Wrachtrup，“金刚石中单个自旋之间的多方纠缠”, 《科学》320，1326（2008）。[71] L. Childress、M. V. Gurudev Dutt、J. M. Taylor、A. S. Zibrov、F. Jelezko、J. Wrachtrup、P. R. Hemmer 和 M. D. Lukin，“金刚石中耦合电子与核自旋量子比特的相干动力学”, 《科学》314，281（2006）。[72] G.-Q. Liu、X.-Y. Pan、Z.-F. Jiang、N. Zhao 和 R.-B. Liu，“室温下量子涨落对自旋自由感应衰减的可控影响”, 《科学报告》2，432（2012）。[73] J. R. Maze、A. Dr´eau、V. Waselowski、H. Duarte、J.-F. Roch 和 V. Jacques, “金刚石中单个自旋的自由感应衰减”, 《新物理学杂志》14，103041（2012）。[74] S. Takahashi、R. Hanson、J. van Tol、M. S. Sherwin 和 D. D. Awschalom，“通过自旋浴极化抑制金刚石中的自旋退相干”, 《物理评论快报》101，047601（2008）。[75] P. London、J. Scheuer、J.-M. Cai、I. Schwarz、A. Ret[76] zker、M. B. Plenio、M. Katagiri、T. Teraji、S. Koizumi、J. Isoya、R. Fischer、L. P. McGuinness、B. Naydenov 和 F. Jelezko，“利用单电子自旋上的双共振探测并极化核自旋”, 《物理评论快报》111，067601（2013）。[76] V. Jacques、P. Neumann、J. Beck、M. Markham、D. Twitchen、J. Meijer、F. Kaiser、G. Balasubramanian、F. Jelezko 和 J. Wrachtrup，“室温下通过光泵浦金刚石中氮空位色心实现单个核自旋的动态极化”, 《物理评论快报》102，057403（2009）。[77] R. Fischer、C. O. Bretschneider、P. London、D. Budker、D. Gershoni 和 L. Frydman，“通过光泵浦增强室温下的整体核极化”, 《物理评论快报》111，057601（2013）。[78] G. A. ´Alvarez、C. O. Bretschneider、R. Fischer、P. Lon ^{13}don、H. Kanda、S. Onoda、J. Isoya、D. Gershoni 和 L. Frydman，“可变磁场与取向下氮空位中心金刚石中的局部与整体 ^{13}C超极化”, 《自然·通讯》6，8456（2015）。[79] J. P. King、K. Jeong、C. C. Vassiliou、C. S. Shin、R. H. Page、C. E. Avalos、H.-J. Wang 和 A. Pines，“室温下由光泵浦氮空位中心金刚石产生的原位核自旋超极化”, 《自然·通讯》6, 8965 (2015). [80] J. Scheuer, I. Schwartz, Q. Chen, D. Schulze- S¨unninghausen, P. Carl, P. H¨ofer, A. Retzker, H. Sumiya, J. Isoya, B. Luy, M. B. Plenio, B. Naydenov, and F. Jelezko, “金刚石中光诱导的动态核自旋极化,” New J. Phys 18, 013040 (2016). [81] T. Chakraborty, J. Zhang, and D. Suter, “任意磁场下金刚石中NV中心的电子与核自旋极化：光泵浦过程分析,” New J. Phys 19, 073030 (2017). [82] J. Scheuer, I. Schwartz, S. M¨uller, Q. Chen, I. Dhand, M. B. Plenio, B. Naydenov, and F. Jelezko, “核自旋系综极化与检测的稳健技术,” 《物理评论B辑》96, 174436 (2017). [83] Y. Hovav, B. Naydenov, F. Jelezko, and N. Bar-Gill, “利用金刚石中的氮空位中心实现低场核极化,” 《物理评论快报》 120, 060405 (2018). [84] J. Henshaw, D. Pagliero, P. R. Zangara, M. B. Franzoni, A. Ajoy, R. H. Acosta, J. A. Reimer, A. Pines, and C. A. Meriles, “通过无微波集成交叉效应实现碳-13动态核极化,” Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A. 116, 18334 (2019). [85] H.-P. Breuer and F. Petruccione, 《开放量子系统理论》（牛津大学出版社，牛津, 2007）。[86] U. Weiss, 《量子耗散系统》，第4版（世界科学出版社，新加坡，2012）。[87] H.-P. Breuer, E.-M. Laine, J. Piilo, and B. Vacchini, “$Colloquium$：开放量子系统中的非马尔可夫动力学”, 《现代物理评论》88, 021002 (2016). [88] I. de Vega and D. Alonso, “非马尔可夫开放量子系统的动力学”, 《现代物理评论》89, 015001 (2017). [89] H.-B. Chen, G.-Y. Chen, and Y.-N. Chen, “非平衡开放量子系统非马尔可夫信息流的热力学描述”, 《物理评论A辑》96, 062114 (2017). [90] H.-B. Chen, N. Lambert, Y.-C. Cheng, Y.-N. Chen, and F. Nori, “利用非马尔可夫度量评估光合作用的量子主方程”, 《科学报告》5, 12753 (2015). [91] C. M. Kropf, C. Gneiting, and A. Buchleitner, “无序量子系统的有效动力学”, Phys. Rev. X 6, 031023 (2016). [92] H.-B. Chen, “结构无序哈密顿量系综的对称性破缺对量子比特各向异性退相干的影响”, 《科学报告》12, 2869 (2022)。